

## АНАЛИЗ ЗОННЫХ СТРУКТУР ГЕТЕРОИНТЕРФЕЙСА НА ОСНОВЕ LAO/STO

Варламова И.И., Киямов А.Г., Пиянзина И.И.

*Институт физики КФУ, Казань  
varlamova.irina93@gmail.com*

Поиск в материалах новых коллективных электронных состояний является одним из основных направлений современной физики конденсированного состояния. В последнее время основной интерес заключается в исследовании гетероструктур - слоистых материалов, образованных путем соединения двух или более структурно и химически различных веществ. Гетероструктуры на основе оксидов переходных металлов являются перспективной областью исследования нового направления физики. Эти соединения примечательны тем, что электроны d-оболочки сильно коррелированы. Это приводит к интересным многочастичным явлениям, таким как высокотемпературная сверхпроводимость, сегнетомагнетизм, колоссальное магнетосопротивление, сегнетоэлектричество. В 2004 году обнаружили проводимость в гетероинтерфейсе, состоящем из двух изоляторов  $\text{LaAlO}_3$  и  $\text{SrTiO}_3$  (LAO/STO) [1].

В рамках настоящей работы с помощью ab initio расчетов методом теории функционала плотности [2,3], реализованного в программе MedeA-VASP 5.3 [4], решалась задача исследования электронных свойств гетероинтерфейса LAO/STO. Рассматриваемые структуры представляли собой ограниченную с двух сторон разным количеством слоев  $\text{LaAlO}_3$  центральную область  $\text{SrTiO}_3$  (5,5 слоёв,  $\text{TiO}_2$  - поверхностный). Изучалась зависимость зонной структуры и плотности состояния от количества слоев  $\text{LaAlO}_3$ . Полученные результаты коррелируют с ранее известными [5,6]. Наши результаты могут быть использованы для выделения проводящего слоя в гетероинтерфейсе. В дальнейшем планируется рассмотрение влияния кислородных вакансий на проводимость.

Выражаем благодарность НИВЦ МГУ за доступ на суперкомпьютер «Ломоносов».

1. A. Ohtomo, H. Y. Hwang. Nature, 2004, 427, 423-426.
2. P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. B, 1964, 136, 864.
3. W. Kohn, L.J. Sham, Phys. Rev. A, 1965, 140, 1133.
4. MedeA® and Materials Design®, 2013. [www.materialsdesign.com](http://www.materialsdesign.com).
5. F. Cossu, U. Schwingenschlögl, V. Eyert. Phys. Rev. B, 2013, 88, 045119.
6. R. Pentcheva, W. E. Pickett. Phys. Rev. B, 2008, 78, 205106.